

Beszámoló
az F47159 számú
OTKA pályázathoz

Török János

Budapest, 2008. március 6.

A pályázati időszak alatt sikerült sokrétű munkát végezni amelynek során különböző eszközöket felhasználva értünk el fontos eredményeket a szemcsés anyagok kutatása során. A munkatervben tervezett három témakör közül kettőben jelentős előrehaladást értünk el, a harmadikra nem maradt idő, mivel az első pontnál létrehozott új model igen hasznosnak, alkalmazhatósága pedig szerteágazónak bizonyult.

A munkánk során sikerült kapcsolatot teremtenünk jól ismert sztohasztikus, statisztikus fizikai modellek, elvek és a szemcsés anyagok által mutatott jelenségek között. Ezt igen fontosnak tartom mivel így az ott elért eredmények azonnal alkalmazhatóvá válnak.

Sikerült megmutatni, hogy a felül nyitott falakkal rekeszekre osztott tartályban rázott szemcsés anyag viselkedésének leírására az irodalomban használt két modell egy általános modelcsoport a zero-range process (nulla hatótávolságú folyamat) osztályába tartozik. A mások által kísérletekkel is vizsgált jelenség (amelyet eredetileg a Maxwell démon granulás megfelelőjeként vezettek be) nemegyensúlyi fázisátalakulást mutat a kondenzált (minden részecske egy rekeszben) és a homogén (minden rekeszben kb. ugyanannyi szemcse) állapot között. A fenti kapcsolat segítségével sikerült meghatároznunk a fázisdiagrammot és a kondenzációs időt általánosan mindkét modell esetén nagy részecske- és rekeszszám esetén analitikusan.

Második témakör a lokális erők szemcseméret függésének vizsgálta volt. Arra kerestük a választ, hogy miként lehet megvédeni bizonyos tulajdonságú részecskéket nagyobb erőhatástól. Legfontosabb eredmény, hogy a normált maximális nyomóerő egy adott méretű szemcsén lineárisan függ a normált szemcsemérettől. A normálás minkét esetben az adott konfigurációra vonatkozik. Az egyenes érdekessége, hogy az pozitív méretnél metszi az x tengelyt, ami azt jelenti, hogy az átlagos szemcseméretnél megfelelően (annak $1/3$ -a) kisebb szemcsékre statisztikusan nem hat erő. Ezt a feltevés térkitöltési problémák irodalmának vizsgálatával sikerült igazolni.

A munka harmadik részében triaxiális nyírás szimuláltunk molekuláris dinamikával. Három fontos eredményt sikerült elérnünk. Egyrészt sikerült megmutatnunk, hogy ha az összenyomást végző lapka elfordulhat az megváltoztatja a létrejövő nyírási sáv szimmetriáját, illetve, megmutattuk, hogy miként alkalmazható a részecskék szögsebessége, a lokális deformáció, a lokális kitöltöttség, illetve a koordinációs szám a nyírási zóna azonosítására. Kiderült, hogy mind a négy mennyiség korrelál egymással, de érzékenyséjük jelentősen eltér, ami alapján a szögsebességet és a lokális deformációt érdemes alkalmazni. Képfeldolgozás során használatos hisztogram technika segítségével megmutattuk, hogy a nyírási sávban található kitöltöttség független a kezdeti feltételektől és csak a részecskék közötti sűrűlődtől függ.

Negyedik nagy témakör a minimális disszipáció elvének alkalmazhatósága

volt. Az elv azt jelenti, hogy kvázi statikus nyírás során, amikor a szemcsék lendülete elhanyagolható, a nyírási sáv ott jelenik meg, ahol a sávban létrejövő disszipáció minimális. Az elvet alkalmazva sikerült meghatározni a nyírási sáv helyét olyan kísérleti berendezés esetén, ahol más modellel azóta sem sikerült eredményt elérni. Az elvnek voltak olyan jóslatai is, amelyeket azóta kísérletekben sikeresen megtaláltak, a legfontosabb ezek közül a zárt, kupola alakú nyírási sáv mély minta esetén. A fázisátalakulás rendjéről azóta is termékeny vita folyik.

A minimális disszipáció elve nem ad választ a térbeli eloszlásra, ami pedig elengedhetetlen a kísérletekkel való számszerű összevetéshez. Ezért kombináltuk a modellt a PhD dolgozatom témáját alkotó sztochasztikus modellel. Az így létrejött mezoszkopikus modell teljes egyezést mutatott az akkori és az azóta megjelent kísérleti eredményekkel is.

Az így létrejött sztochasztikus modell alkalmas más egyszerűbb kísérleti elrendezés szimulálására is. Ezek közül elsőként a gyűrűs nyírásra koncentráltunk, ahol francia partnerektől és irodalomból megfelelő minőségű adatokat sikerült szereznünk. A mezoszkopikus modell jól teljesített és hűen adta vissza a sűrűség és sebességprofilokat. Az eredményekből jelenleg írjuk a cikket.

A legegyszerűbb nyírási elrendezés, az egyenes nyírás vizsgálata több szempontból is kiadósabbnak bizonyult, mint az előző. Egyrészt az általunk definiált modell ebben az esetben megegyezik egy régi statisztikus fizikai modellel, a Bak-Sneppen féle evolúciós modellel, különbség csupán a határfeltételekben van. Mivel a fenti modellre több száz hivatkozás van ezért sok eredmény ismert, sajnos nagy többségük másfajta határfeltételekkel. Így is sikerült sok jóslatot felállítanunk, most már nem csak a sebességprofilra, vagy a kitöltöttségre, hanem időbeli korrelációkra és a határ menti viselkedésre, méret szerinti skálázásra. Mivel ilyen jellegű adatok jelenleg nincsenek, ezért mi vállalkoztunk arra, hogy molekuláris dinamikai szimulációkkal keressük a választ, hogy milyen mélységig helytállóak a midell eredményei. Jelenleg a szimulációs munka van folyamatban.

Osszefoglalva, kijelenthetem, hogy a szemcsés anyagok nyírásának és rázásának megismerésében több új eredményt is sikerült létrehozni, amelyekre eddig 16 hivatkozás érkezett. Fontosnak tartom kiemelni, hogy a munka során igen sokféle eszközt használtunk és ezáltal általános összefüggéseket sikerült feltárnunk.